Письма в ЭЧАЯ. 2022. Т. 19, № 1(240). С. 61–66

О РАЗНОСТНЫХ СХЕМАХ ДЛЯ ЗАДАЧИ МНОГИХ ТЕЛ, СОХРАНЯЮЩИХ ВСЕ АЛГЕБРАИЧЕСКИЕ ИНТЕГРАЛЫ ДВИЖЕНИЯ

А. Баддур [а], *М. Д. Малых* [б, 1]

[а] Российский университет дружбы народов, Москва
[б] Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Предложен новый подход к конструированию разностных схем любого порядка для задачи многих тел, сохраняющих все ее алгебраические интегралы. В его основе — комбинирование метода квадратизации энергии и отказ от наследования симплектической структуры. Представлены результаты тестирования простейшей из этого класса схем. Для тестирования избрана плоская задача трех тел равной массы. Рассмотрен случай, когда тела проходят близко друг к другу, для чего специально разработан алгоритм измельчения шага по времени возле числовых особенностей. Проведено сравнение с явным методом Рунге–Кутты 4-го порядка и простейшим симплектическим методом — схемой средней точки.

A new approach to the creation of difference schemes of any order for the many-body problem that preserve all its algebraic integrals is proposed. It is based on the combination of two ideas: the method of energy quadratization and the rejection of inheritance of symplectic structure. Results of the tests with the simplest scheme of this class are presented. A flat three-body problem with equal masses is selected for testing. The case when bodies pass close to each other is considered, for which purpose the algorithm of time step scaling near numerical singularities is specially developed. A comparison with the explicit Runge–Kutta method of the 4th order and the simplest simplectic method, the midpoint scheme, was made.

PACS: 45.50.Pk; 95.10.Ce; 45.20.Jj

ВВЕДЕНИЕ

Задача многих тел [1] обладает целым рядом алгебраических свойств, которые могут наследоваться разностными схемами. В конце 1980-х гг. был открыт целый класс среди схем Рунге–Кутты, осуществляющих на каждом шаге каноническое преобразование и поэтому сохраняющих фазовый объем. Эти схемы получили название симплектических схем Рунге–Кутты [2, §VI.3]. К их достоинствам следует отнести

[1] E-mail: malykh_md@pfur.ru, mmalykh@jinr.ru

возможность построения схемы любого порядка, к очевидным недостаткам — неявность этих схем, приводящую к необходимости решать систему нелинейных уравнений на каждом шаге.

Задача многих тел имеет 10 независимых алгебраических интегралов движения, и в силу теоремы Брунса [3,4] всякий другой алгебраический интеграл выражается через эти интегралы. Любая схема Рунге–Кутты, даже явная схема Эйлера, сохраняет все линейные интегралы движения. Из общих соображений можно было бы надеяться на то, что сохранение симплектической структуры приведет к сохранению всех алгебраических интегралов движения. Однако удалось доказать, что симплектические схемы Рунге–Кутты сохраняют точно квадратичные интегралы движения [2, §IV.2.1]. Девять из них являются квадратичными функциями относительно координат тел и их скоростей и t, поэтому симплектические схемы сохраняют их точно. Первая разностная схема, сохраняющая все 10 классических интегралов движения, была предложена в 1992 г. Гринспеном [5,6] (см. также [7,8]). Метод построения этой схемы никак не связан с идеей сохранения симплектической структуры.

Если, вопреки традиции, предположить, что точное наследование одной алгебраической структуры изменяет другие структуры, то при построении разностных схем, точно сохраняющих все алгебраические интегралы движения, не следует заботиться о сохранении симплектической структуры. Еще Купер [2, §IV.2.1] заметил, что симплектические разностные схемы сохраняют квадратичные интегралы не только гамильтоновых, но и вообще любых динамических систем. Поэтому для точного сохранения механической энергии достаточно сделать замену переменных, относительно которых энергия является квадратичной функцией. Этот метод был предложен в 2016 г. Янгом [9, 10] и применен к задаче двух тел [11]. В настоящей работе мы покажем, как выполнить такую квадратизацию полной механической энергии, если выйти из класса канонических преобразований переменных (см. также [12]).

1. КВАДРАТИЗАЦИЯ ЭНЕРГИИ

Классическая задача n тел состоит в отыскании решений автономной системы обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$m_i\ddot{\vec{r}}_i = \sum_{j=1}^{n} \gamma \frac{m_i m_j}{r_{ij}^3} \left(\vec{r}_j - \vec{r}_i\right), \quad i = 1, \ldots, n. \tag{1}$$

Здесь $\vec{r}_i$ — радиус-вектор, проведенный в i-е тело, а r_{ij} — расстояние между i-м и j-м телами. Обозначим для краткости координаты скорости i-го тела как $\dot{x}_i = u_i$, $\dot{y}_i = v_i$ и $\dot{z}_i = w_i$ и будем соединять их в вектор $\vec{v}_i$. Введем следующие дополнительные переменные:

$$r_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2},$$
$$\rho_{ij} = \frac{1}{r_{ij}}, \quad i, j = 1, 2, \ldots, N, \, i < j.$$

Тогда получится система обыкновенных дифференциальных уравнений, которая состоит из системы для координат

$$\dot{\vec{r}}_i = \vec{v}_i, \quad i = 1, \dots, n, \tag{2}$$

системы для скоростей

$$m_i \dot{\vec{v}}_i = \sum_{j=1}^{n} \gamma \frac{m_i m_j \rho_{ij}}{r_{ij}^2} \left(\vec{r}_j - \vec{r}_i\right), \quad i = 1, \dots, n, \tag{3}$$

системы для расстояний

$$\dot{r}_{ij} = \frac{1}{r_{ij}} (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \cdot (\vec{v}_i - \vec{v}_j), \quad i, j = 1, \dots, n;\ i \neq j, \tag{4}$$

и системы для обратных расстояний

$$\dot{\rho}_{ij} = -\frac{\rho_{ij}}{r_{ij}^2} (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \cdot (\vec{v}_i - \vec{v}_j), \quad i, j = 1, \dots, n;\ i \neq j. \tag{5}$$

Эта система обладает 10 классическими интегралами задачи многих тел, а именно:
1) законом сохранения импульса

$$\sum_{i=1}^{n} m_i \vec{v}_i = \mathrm{const},$$

2) законом сохранения момента импульса

$$\sum_{i=1}^{n} m_i \vec{v}_i \times \vec{r}_i = \mathrm{const},$$

3) законом движения центра масс (3 скалярных интеграла)

$$\sum_{i=1}^{n} m_i \vec{r}_i - t \sum_{i=1}^{n} m_i \vec{v}_i = \mathrm{const},$$

4) законом сохранения энергии

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{m_i}{2} (u_i^2 + v_i^2 + w_i^2) - \gamma \sum_{i,j} m_i m_j \rho_{ij} = \mathrm{const},$$

— и дополнительными интегралами

$$r_{ij}^2 - (x_i - x_j)^2 - (y_i - y_j)^2 - (z_i - z_j)^2 = \mathrm{const}, \quad i \neq j, \tag{6}$$

и

$$r_{ij} \rho_{ij} = \mathrm{const}, \quad i \neq j. \tag{7}$$

Любая симплектическая схема Рунге–Кутты, в том числе схема средней точки, записанная не для исходной, а для новой, расширенной системы, сохраняет все классические интегралы движения и интегралы связей, поскольку все они даются многочленами первого и второго порядков. Сохранение интегралов связи весьма важно, поскольку позволяет избавиться от дополнительных переменных без внесения ошибок. Таким образом, мы можем построить разностную схему любого порядка аппроксимации для задачи многих тел, сохраняющую все ее алгебраические интегралы.

2. КОМПЬЮТЕРНЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

В CAS Sage мы реализовали метод средней точки решения динамической системы. В качестве метода решения нелинейных систем уравнений, возникающих на каждом шаге, используется метод простых итераций с контролем точности по значениям интегралов движения. В нашей программе предусмотрена возможность автоматического измельчения шага дискретизации по времени, обеспечивающая сходимость метода простых итераций.

Мы применили схему средней точки к плоской задаче трех тел равной массы $m_i = 1$, записанной в форме (2)–(5), для ряда начальных данных, в том числе дающих решение в элементарных функциях [12]. Здесь мы подробно рассмотрим один случай, когда точное решение неизвестно. При начальных данных

$$x_1 = 0, \quad x_2 = 1{,}51, \quad x_3 = 2, \quad y_1 = 1, \quad y_2 = 1{,}86, \quad y_3 = 1$$

и

$$u_1 = 0{,}51, \quad u_2 = 0{,}5, \quad u_3 = -0{,}99, \quad v_1 = -0{,}86, \quad v_2 = 0{,}85, \quad v_3 = 0{,}02$$

три тела движутся довольно долго близко друг к другу, при этом траектории много раз пересекаются (рис. 1). При $t = 4{,}628$ наш алгоритм останавливает вычисления, в этот момент первое и второе тело подлетают друг к другу и требуемый шаг становится слишком маленьким.

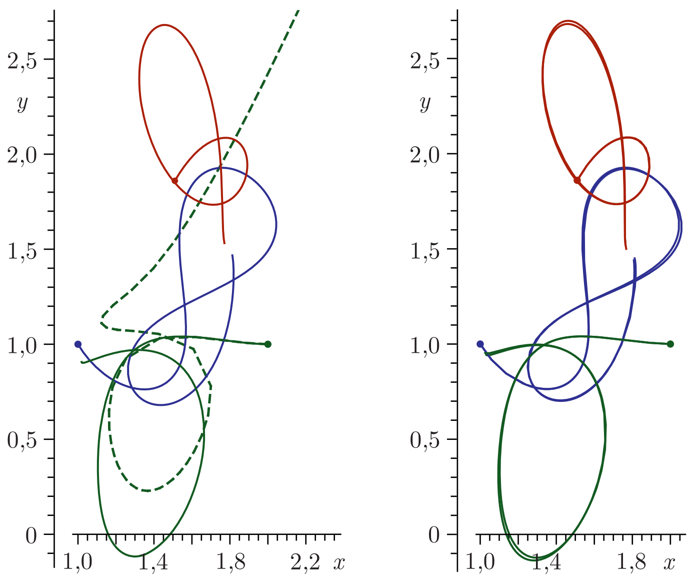

Рис. 1. Траектории тел в тестовой задаче (шаг $dt = 0{,}1$). На обоих рисунках сплошными линиями указаны траектории, найденные по схеме средней точки, примененной к системе с дополнительными переменными; штриховой линией на левом рисунке обозначена траектория 3-го тела, найденная по методу rk4, на правом — траектории трех тел, найденные по схеме средней точки без введения дополнительных переменных

Сравним нашу схему с явной схемой Рунге–Кутты 4-го порядка (rk4), примененной к задаче многих тел в исходной постановке (1), взяв тот же шаг $\Delta t = 0{,}1$. Этот метод давно стал стандартом по умолчанию для численного интегрирования динамических систем. Мы реализуем его в Sage без каких-либо доработок. На рис. 1 хорошо видно, что с течением времени траектории тел отдаляются друг от друга все заметнее, с потерей какого-либо сходства уже при $t \simeq 3$. При этом не сохраняется полная механическая энергия. На рис. 2 хорошо видно, что полная энергия меняется скачками, самый большой из которых приходится на $t = 3{,}4$, когда траектории теряют сходства с найденными по нашей схеме. Положения этих скачков зависят от выбора шага.

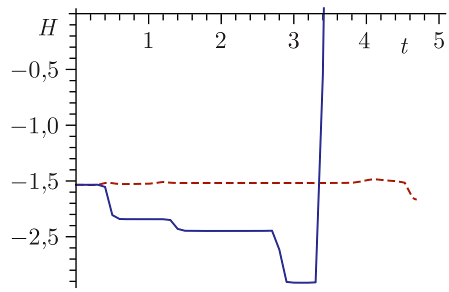

Рис. 2. Зависимость энергии от времени (шаг $dt = 0{,}1$), найденная по явной схеме Рунге–Кутты 4-го порядка (сплошная линия) и по схеме средней точки без введения дополнительных переменных (штриховая)

Этот пример прекрасно демонстрирует главный недостаток явной схемы Рунге–Кутты. Из-за несохранения энергии внезапно происходят ее резкие изменения и численное решение перескакивает на другую интегральную кривую, из-за чего этот метод нельзя использовать при расчетах для больших промежутков времени, во всяком случае без специально разработанного контроля точности. Что именно запускает этот процесс, неясно, но в районе $t = 3{,}4$ тела находятся достаточно далеко друг от друга. Предложенная нами схема принципиально свободна от этого недостатка.

Затем мы сравнили наш подход с простейшей симплектической схемой Рунге–Кутты — схемой средней точки — для задачи трех тел в исходной постановке (1). Результаты вычислений, равно как и затраты по времени их получения, оказались весьма близкими (см. рис. 1). Существенная разница проявилась лишь при анализе изменения энергии: при расчетах по нашему методу изменение энергии оставалось в заданном коридоре (в наших экспериментах мы брали $\pm 10^{-8}$), а при расчетах по схеме средней точки без введения дополнительных переменных долгое время оказывалось в коридоре 10^{-2}, но при $t \simeq 5$ все-таки вышло за его границы (см. рис. 2). Таким образом, мы добились гарантированного удержания энергии на заданном уровне, лишь немного усложнив сам метод.

Разумеется, мы оставили в списке интегралов только квадратичные интегралы относительно координат и скоростей, поскольку добавление энергии в список сохраняющихся величин в нашей программе приводит к ошибке, означающей, что этот интеграл действительно не сохраняется при приближенном решении.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В этой статье мы стремились показать, что отказ от гамильтоновой формы задачи многих тел позволяет строить разностные схемы любого порядка, сохраняющие все классические интегралы точно. Компьютерные эксперименты подтвердили возможность организации вычислений по одной из таких схем, обеспечивающей сохранение всех алгебраических интегралов с заданной точностью. Поскольку схема не является явной, на каждом шаге приходится решать численно систему нелинейных уравнений, из-за чего добиться точного сохранения интегралов невозможно.

Предложенный метод существенно сложнее явного метода Рунге–Кутты, недостатки которого хорошо проявились в тесте, когда при вычислении по методу rk4 энергия внезапно и без видимой причины резко менялась. По затрату ресурсов наш метод близок к простейшему симплектическому методу Рунге–Кутты — схеме средней точки. В сравнении с ним, мы добиваемся гарантированного удержания энергии на заданном уровне ценой малоприметного усложнения метода.

Благодарности. Работа выполнена при поддержке РНФ (грант № 20-11-20257).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Marchal Ch.* The Three-Body Problem. Elsevier, 1990.
2. *Hairer E., Wanner G., Lubich Ch.* Geometric Numerical Integration. Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations. Berlin, Heidelberg, New York: Springer, 2000.
3. *Bruns H.* Über die Integrale der Vielkörper-Problems // Acta math. 1887. V. 11. P. 25–96.
4. *Painlevé P.* Mémore sur les intégrales du problème des n corps // Œuvres de Paul Painlevé. 1975. V. 2. P. 666–699.
5. *Greenspan D.* Completely Conservative and Covariant Numerical Methodology for N-Body Problems with Distance-Dependent Potentials. Tech. Rep. No. 285. 1992; http://hdl.handle.net/10106/2267.
6. *Greenspan D.* N-Body Problems and Models. World Sci., 2004.
7. *Simo J.C., González M.A.* Assessment of Energy-Momentum and Symplectic Schemes for Stiff Dynamical Systems. American Society of Mechanical Engineers, 1993.
8. *Graham E., Jelenic G., Crisfield M.A.* A Note on the Equivalence of Two Recent Time $[U + 2010]$ Integration Schemes for $N[U + 2010]$ Body Problems // Commun. Numer. Meth. Eng. 2002. V. 18. P. 615–620.
9. *Yang X., Ju L.* Efficient Linear Schemes with Unconditional Energy Stability for the Phase Field Elastic Bending Energy Model // Comput. Meth. Appl. Mech. Eng. 2016. V. 315. P. 11.
10. *Yang X., Ju L.* Linear and Unconditionally Energy Stable Schemes for the Binary Fluid-Surfactant Phase Field Model // Comput. Meth. Appl. Mech. Eng. 2017. V. 318. P. 01.
11. *Zhang H., Qian X., Song S.* Novel High-Order Energy-Preserving Diagonally Implicit Runge–Kutta Schemes for Nonlinear Hamiltonian ODEs // Appl. Math. Lett. 2020. V. 102. P. 106091.
12. *Ayryan E.A., Malykh M.D., Sevastianov L.A., Ying Yu.* On Periodic Approximate Solutions of the Three-Body Problem Found by Conservative Difference Schemes // Intern. Workshop on Computer Algebra in Scientific Computing. V. 12291 of Lecture Notes in Computer Science. Berlin: Springer, 2020. P. 77–90; https://doi.org/10.1007/978-3-030-60026-6_5.

Получено 31 мая 2021 г.